Dynamical Correlation in an Electron Gas

日大理工　三　沢　節　夫

Dynamical correlation は電子ガスの問題に非常に典型的に現れる。最近，液体 He^3 などでも，一連の nearly ferromagnetic Fermi liquid の一つとして，スピン揺動との dynamical correlation が問題にされているが，Doniach 達の単純なモデルは He^3 に適用し得ないことを指適するにとどめて，ここでは触れない。

電子ガスの問題では，電子間の相互作用として，dynamical なポテンシャル $v(q)/\varepsilon\ (q,\omega)$（$\varepsilon$ は誘電率）で出発するか，または static potential $v(q)/\varepsilon\ (q,0)$ をとるかで理論的結果に質的相異を与えるが，その理論が必ずしも decisive でなく，一方，実験でもどちらがより realistic であるかについて答を与える程精密ではない。電子フオノン相互作用の効かないスピン常磁性帯磁率とか，プラズマ振動数の分散項などについてさえ事態はあまり明瞭でない。アルカリ金属のアンモニヤ溶液とか degenerate semiconductor で r_s を自由に変えられるような実験ができることが望まれる。

古典プラズマ（高温・低密度）では Montroll-Ward を見ると，一見 dinamical な効果は Debye-Hückel (DH) の補正項には効かないようになっていて，プラズマ振動の寄与が入っているかどうかはっきりしない。しかし，自由エネルギーに対する表式

$$-\frac{1}{2\pi}\sum_{q}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\ \coth\frac{\beta\omega}{2}\mathrm{Im}\,\frac{1}{\varepsilon\ (q,\omega)},\quad \beta=\frac{1}{kT}$$

から plasma pole の寄与だけ拾い出すと，$nkT\,(e^3\,n^{1/2}\beta^{3/2})$ となって DH 項と同じオーダーであり，古典プラズマでも当然 dynamical な効果またはプラズマ効果が問題になる。

Montroll-Ward が DH の状態方程式を導くに当って無視した項が，Abe の計算したような高次の項に効くかどうかはわかっていない。

縮退した電子ガスで，random phase の近似 (RPA) では，dynamicalな

効果は $\varepsilon(q,\omega)=1+(\rho/\pi q^2)Q(q,u)$, $\rho=2r_s/\pi \doteqdot r_s/6.03$, $u=i\omega$ としてQ(q,u) に反映している。short range force のときでも同じ Q(q,u) が現れ dynamical な効果 (zero sound etc.) を与える。よく問題にされる，RPA で pair distribution function g(r) が原点附近で値が負になるという不合理な結論は，このQ(q,u) から派生する。g(r) に対して Ueda 近似をとると，Hubbard 近似と異って，平行スピンの対に関しては何も不合理なことは起らない。反平行スピンの対に対して，

$$g(r)=1-\frac{3}{8\pi^3}\rho\int_0^\infty dqq^2\int_0^\infty du\,\frac{Q^2}{1+\frac{\rho}{\pi q^2}Q}\,\frac{\sin(qk_Fr)}{qk_Fr}$$

であるが，原点 (r＝0) だけ考え，低密度の極限 (strong coupling limit) $\rho\to\infty$ をとると

$$g(0)\to 1-\frac{3}{8\pi^3}\int dqq^4\int du\;Q(q,u)$$

この第2項には $\frac{1}{2}\int_0^\infty dqq^2$ という無限大を含んでいる。どの位の ρ (または r_s) で g(0) が負になるかについては，一般に $r_s\sim 2$ 附近ということになっているが (Hedin), 筆者が数値計算したときには，$r_s=6$ でも負にならなかった (理由はよく分らないが，計算間違いでなければ，q と u 積分の順序によって結果が違うかも知れぬ？)

RPAでは long range correlation だけが取入れられていると考えがちだが，上の unphysical な結果が q の大きい部分の寄与であることから分るように，むしろ short range correlation が強く取入れられ過ぎている。意味のある結果を出すためには，q を適当の所で cut して short range correlation を reduce した方がいいと思われる。

Q(q,u)の特異性はエネルギーには表向き影響を与えない。相関エネルギー

$$\varepsilon_c\sim\frac{1}{\rho^2}\int dqq^3\int du\left\{\log\left(1+\frac{\rho}{\pi q^2}Q\right)-\frac{\rho}{\pi q^2}Q\right\}$$

で strong coupling limit (low density limit) $\rho\to\infty$ をとると，形式的には

$$\varepsilon_c\sim\frac{1}{\rho}\int dqq\int du\;Q(q,u)$$

であるが，これは実は

$$\int_0^\infty d^3 q\, v(q) + （有限項）$$

となって，$g(r)$の場合と同じ性格の無限大を含む。この無限大はlogの項から出る無限大と消し合って，ちょうど有限項だけ残り困った事態は起らない。したがって

$$\varepsilon_C \sim - \frac{3}{2\pi^2} \frac{1}{\rho}$$

この結果は，strong coupling limit として，形式的に $1/\rho$ の摂動展開を行ったとき，その第１項に現れる無限大を捨て去って有限項だけを拾えばよいということを示している点で面白い。なお，上の数値 $(-0.916/r_s)$ は，形の上で Hartree-Fock の exchange energy と全く同じであり，また Wigner lattiee での主要項 $(-0.88/r_s)$ とも殆んど一致している。

電子ガスの種々の性質（比熱，帯磁率，圧縮率，強磁性等）を議論するとき，static なポテンシアル $v(q)/\varepsilon(q,0)$ をとって，それによる particle-hole の散乱を Landau 流に高次まで取入れる Quinn-Ferrell, Osaka, Watabe, Glick の立場と，dynamical effect がより効くであろうという Rice, Misawa, Hamann の立場とがある。$r_s \sim 2$，３程度では両者に質的な差はないが，r_s が大きくなって強磁性が現れるとか，圧縮率が発散するかというよような点に関して，両者は全く異る 前者によれば強磁性とか圧縮率の発散は現れないが後者では $r_s \sim 10$ 程度で強磁性になり，また $r_s \sim 6$ 附近で圧縮率が発散する（この点は大阪さんの指摘による）

電子ガスで強磁性が起るか起らないかという問題は遷移金属の強磁性と直ぐには結びつかないが，一つの出発点になると思う。ＲＰＡでは前述のように $g(r)$ に対する欠陥が現れるが，それは常磁性状態に対して，より一層エネルギーを低く見積っているわけで，実際はＲＰＡ以上に ferro を出現し易くしているという可能性も考えられる。

ＲＰＡの適用限界に関して，エネルギーから Ferrell の定理を使って，$r_s \lesssim 1$ という結論を出す話が世間に流布していて，Pines Nozieres の本にも書いてあるが，正しくない。Gell-Mann Brueckner の表式は，r_s展

開をしなければ，どんな大きい r_s でも Ferrell の定理と矛盾しない。なお，Ferrell の定理 $\partial^2 E/\partial\lambda^2 \leqq 0$ （λ は結合定数）は，$\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} = V$（V はポテンシャル・エネルギー）と組合せると $\lambda\frac{\partial\tau}{\partial\lambda} \geqq 0$ （T は運動エネルギー）が得られることから分るように，「運動エネルギーは相互作用常数の単調増大関数である（$\lambda > 0$ のとき）」という定理と同等である。また，電子ガスに対して $\lambda\frac{\partial E}{\partial\lambda} = v$ と $E = \lambda^2 f\ (\lambda n^{-1/3})$ を使うと直ちに Virial 定理が出る。

電子ガスで体積の変化に対する instability に対して，uniform background model でのエネルギーを使って議論をすることは正しくない。Pines Nozieres は r_s 展開の圧縮率の表式を用い，それが発散する点を gas-solid の転移と考えたが，正に二重の誤りを犯している。uniform background model で positive ion を塗りつぶして，その運動エネルギーを無視していることは，ion の質量無限大を仮定することに相当する。一方，電子ガスのエネルギーから圧力の表式など導くことは，ion の無限大の inertia に目をつぶって，電子ガスの体積を変えれば，それに応じて uniform positive charge も自由自在に体積を変えることを暗黙のうちに仮定していて，出発点の仮定と矛盾する。この点に注意しないと，電子ガスの問題ではいろいろの paradox にぶっつかる。例えば，low-density limit では，よく知られたように Wigner lattice が安定だが，充分 low density では $\varepsilon \propto -1/r_s$ だから，この領域で

$$\frac{\partial v}{\partial p} > 0 \quad (V\,;\ 体積,\ p\,;\ 圧力)$$

となって，Wigner lattice は熱力学的に存在し得ないという結論を導いてしまう。もちろん，圧縮率が発散する点では，電子間の相互作用が drastic に変って，系に何らかの不安定性を引き起す可能性はあるが，gas（または liquid）から Wigner lattice その転移とは全くかかわりのない問題である。